

Modellierung der Dehydratisierung von t-Butanol unter Vermeidung der Oligomerenbildung

Die schwefelsaure Dehydratisierung von t-Butanol (TBA) ist ein geeignetes Verfahren zur Herstellung von sehr reinem Isobuten. Die hohen Qualitätsansprüche an Isobuten sind insbesondere dann von Bedeutung, wenn Polymere mit hohem Molekulargewicht synthetisiert werden sollen. Die schwefelsaure Rückspaltung von TBA ist problematisch und liefert je nach Zusammensetzung der Säurephase unterschiedliche Isobutenausbeuten. Besonders bei höheren Temperaturen und Schwefelsäurekonzentrationen sind Oligomere des Isobutens als unerwünschte Nebenprodukte zu erwarten.

In dieser Arbeit wird die Optimierung des Dehydratisierungsprozesses in Bezug auf die maximale Isobutenausbeute unter Vermeidung von Oligomerenbildung untersucht. Hierzu wird ein mechanistisches Reaktionsmodell entwickelt, welches die Acidität des Lösungsmittels in Form der Hammett'schen Aciditätsfunktion berücksichtigt. Dieses Reaktionsmodell beinhaltet postulierte Intermediate, wie das t-Butyloxoniumion, das Trimethylcarboniumion, den Di-tert.-butylether (DTBE) und die protonierte Form des Ethers.

Die Ermittlung der Reaktionsparameter erfolgt für den stationären, isothermen CSTR-Betrieb und für die Temperaturen 63°C, 68°C sowie 73°C. Es werden für verschiedene stationäre Betriebspunkte Analysenproben aus Flüssig- und Gasphase des Reaktors entnommen.

Die Kopplung der CSTR-Bilanz mit einem durch Quasistationaritätsbetrachtungen vereinfachten kinetischen Modell, sowie die Anpassung an die ermittelten Messdaten liefert Modellparameter, die sich am Reaktionsmechanismus gut interpretieren lassen. Insbesondere ist es bemerkenswert, dass der Reaktionsweg über die Etherbildung von Bedeutung ist und die Isobutenbildung bei steigender Temperatur immer mehr vom Zerfall des DTBEs bestimmt wird.

Das hier erarbeitete mechanistische Modell kann in Kombination mit den Ergebnissen von Allenbach durch numerische Simulationsrechnungen diejenigen Betriebszustände ermitteln, bei denen Oligomerenbildung vermieden wird. Dadurch wird eine Optimierung des Dehydratisierungsprozesses ermöglicht.